

## Programa de cálculo de las constantes ópticas de materiales opacos en Fortran IV

por J. BESTEIRO,\* F. M. LACASTA,\*\* A. LÓPEZ--SOLER,\* J. M. BOSCH-FIGUEROA \*  
y M. FONT-ALTABA \* \*\*\*

### RESUMEN

Cuando se desea calcular las constantes ópticas  $n$ ,  $k$  a partir de las medidas de reflectancia en aire y aceite de inmersión, es necesario manejar gran cantidad de datos experimentales, sobre todo si se pretende construir las curvas de dispersión de estas constantes desde los 400 nm a los 1.100 nm, efectuando series de 100 lecturas cada 10 nm. Para manejar esta gran cantidad de datos se propone el programa denominada IRCA escrito en FORTRAN IV para utilizar con computadoras IBM modelos 1130 o 360.

### SUMMARY

When it is desired to calculate the optical constants  $n$ ,  $k$  from measurements of reflectance in air and oil, the amount of experimental data is considerable because measurements are made at every 10 nm from the blue end of the visible right through the near infra-red. To cope with these data it is proposed to use a programme such as that named IRCA written in FORTRAN IV for IBM computers 1130 or 360. The original punched cards are available.

Cuando se estudia mediante la microscopía cuantitativa de reflexión, un mineral opaco y se pretende calcular el valor de las constantes físicas  $n$  (índice de refracción);  $k$  (coeficiente de absorción), puede realizarse a partir de las medidas de su reflectancia en dos medios distintos, de índices de refracción conocidos aplicando las dos ecuaciones (a) y (b): (1) (2).

$$R_{\text{aire}} = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (a)$$

$$R_{\text{aceite}} = \frac{(n-N)^2 + k^2}{(n+N)^2 + k^2} \quad (b)$$

\* Sección de Cristografía, Instituto Jaime Almera, C.S.I.C.

\*\* Departamento de Cálculo, Facultad de Ciencias de Barcelona.

\*\*\* Depart. Crist. y Min., Facultad de Ciencias de Barcelona.

$$n = \frac{1}{2} \frac{(N^2 - 1)(1 - R_{\text{aire}})(1 - R_{\text{aceite}})}{N(1 - R_{\text{aire}})(1 + R_{\text{aceite}}) - (1 - R_{\text{aceite}})(1 + R_{\text{aire}})}$$

$$k = \frac{(n+1)^2 R_{\text{aire}} - (n-1)^2}{1 - R_{\text{aire}}}$$

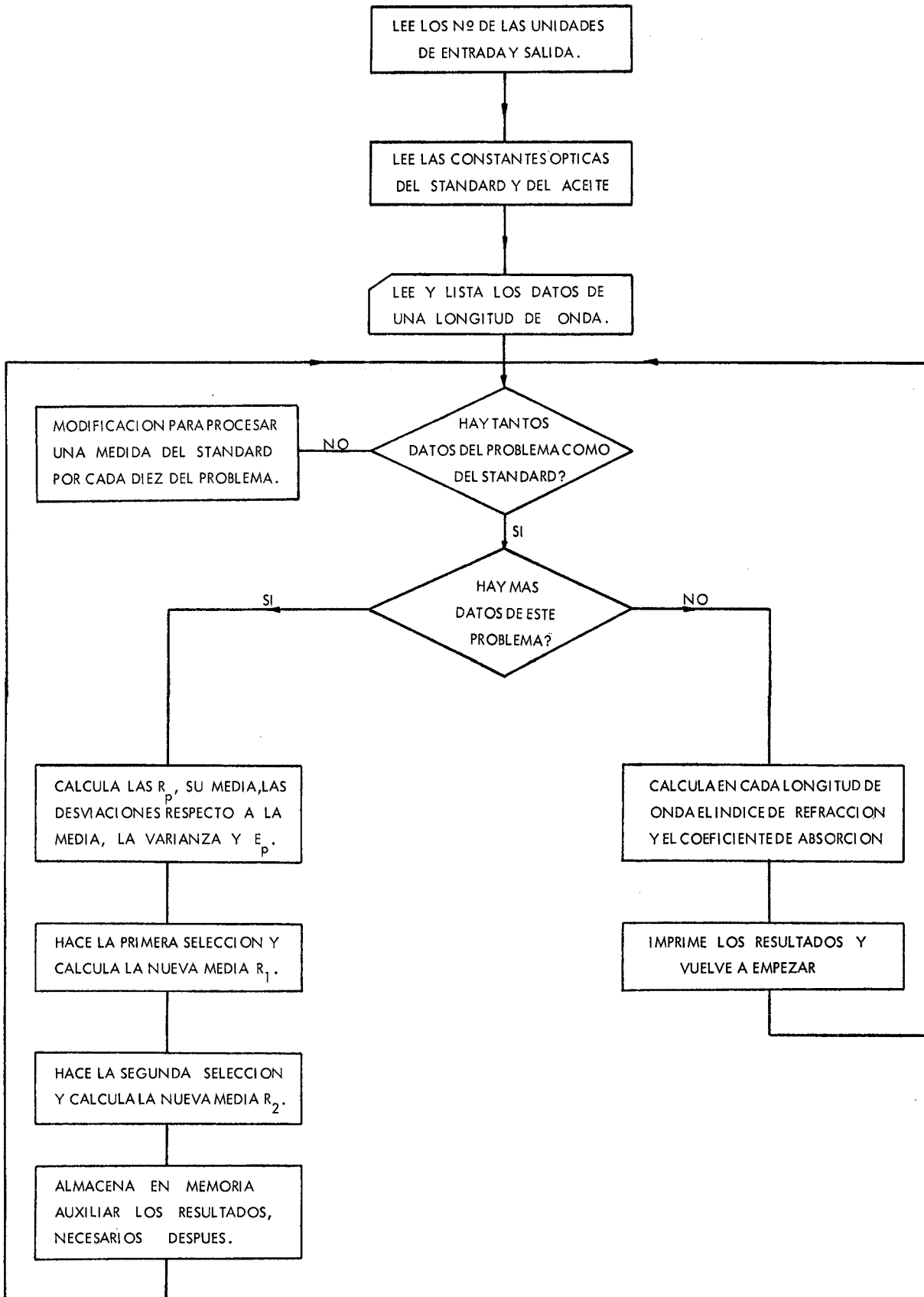
Aparte de lo laborioso que resulta el cálculo hay que tener en cuenta que generalmente se determinan estas dos constantes en todo el espectro visible e incluso en la región del infrarrojo próximo, desde los 400 nm a los 1.100 nm a intervalos de 10 nm. Además si el mineral es anisótropo y el estudio se efectúa con secciones orientadas hay que duplicar el número de cálculos si se trata de un material uniáxico y triplicarlo en el caso de los biáxicos (3), ya que las mediciones se efectúan según cada vibración principal.

Otro de los factores a considerar es que a causa de las limitaciones del método, los datos experimentales hay que tratarlos con criterio estadístico ya que sino no se alcanza un cálculo correcto de  $n$ ,  $k$ , cuando el número de mediciones experimentales no es lo suficientemente grande. Nuestra experiencia nos ha demostrado que normalmente con 10 lecturas en el mineral problema y 10 de la superficie standard utilizada, en cada longitud de onda, son suficientes para que los cálculos de las constantes sean correctos (4).

El programa que se describe a continuación simplifica el cálculo y permite seleccionar de una serie de lecturas las que están comprendidas entre los límites admitidos.

Cuando se trata de efectuar una identificación de un mineral opaco, es suficiente realizar un par de mediciones en las longitudes de onda adoptadas internacionalmente, publicadas en las Tablas Internacionales, que son: 470 nm, 546 nm, 589 nm y 650 nm (5).

# ORGANIGRAMA



## DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

El programa IRCA selecciona lecturas galvanométricas de cantidad de luz reflejada en orden a calcular el índice de refracción y el coeficiente de absorción. Consta de las siguientes partes.

### Fase 1.<sup>a</sup>: Lectura y selección de datos

Para cada longitud de onda lee medidas galvanométricas de problema y standard, en aire, hasta un máximo de 100 (100 de problema y 100 de standard), y calcula otros tantos valores  $R_p$  de reflectancia:

$$R_p = \frac{G_p \times R_s}{G_s}$$

(Los valores de  $R_s$  así como los de índice de refracción del aceite de inmersión utilizado, se leen previamente como se indica más detalladamente en las hojas de descripción de datos).

Si se desea, se pueden dar 100 lecturas del problema y sólo 10 del standard, y entonces calcula las 10 primeras  $R_p$  con el primer valor de  $G_s$ , las 10 segundas con el segundo, etc. En cualquier otro caso en número de medidas del problema ha de ser igual al de medidas del standard.

A continuación, calcula la media  $R$  de las  $R_p$ .

Primera selección: calcula

$$E_p = \frac{|R_p - \bar{R}|}{R}$$

y si  $E_p > 0,02$ , rechaza la correspondiente  $R_p$  y halla la media  $R_1$  de las  $R_p$  no rechazadas.

Segunda selección: considerando de nuevo  $\bar{R}$  calcula

$$S = \sqrt{\frac{\sum (R_p - \bar{R})^2}{N - 1}}$$

donde  $N$  es el número de medidas leídas, y rechaza las  $R_p$  que no verifiquen que  $|\bar{R} - R_p| \leq 1,96 \times S$ .

(La constante 1,96 indica que la probabilidad de que nos equivoquemos, al suponer que las medidas así rechazadas son erróneas es del 5 %.)

Como antes, calcula la media  $R_2$  de las  $R_p$  aceptadas.

Este proceso se lleva a cabo para todas las medidas en aire y luego para las de aceite.

### Fase 2.<sup>a</sup>:

Calcula el índice de refracción y el coeficiente de absorción del problema partiendo del doble juego de datos obtenidos.

## DESCRIPCIÓN DE LAS FICHAS DE DATOS

### 1.º Unidades de entrada y salida. FORMAT (2 I 1).

Columna 1 número de la unidad de entrada.

Columna 2 número de la unidad de salida.

### 2.º Índice de refracción del aceite. FORMAT /10(F 8.6)/.

El programa tiene capacidad para datos de 73 longitudes de onda: de 400 nm hasta 1.100 nm de 10 nm en 10 nm, más los datos de las longitudes de onda standard (546 nm y 589 nm), que se perforan al final y en este orden:

Columnas 1-8 1.º índice.

Columnas 9-16 2.º índice, etc.

(En total hacen falta 8 fichas y en el caso de que no se trabaje con todas las longitudes de onda hay que poner igualmente 8 fichas aunque haya alguna en blanco.)

### 3.º Reflectancia en aire del standard. FORMAT /10 (F 8.6)/ (comenzando ficha nueva y con las indicaciones de arriba).

### 4.º Reflectancia en aceite del standard. FORMAT /10 (F 8.6)/ (comenzando ficha y como antes).

### 5.º Datos (1.ª parte). FORMAT (2(I3, 1X), I4, 2I1, I2, 16F4.2/(16X, 16F4.2)).

Columnas 1-3 número de medidas del problema (máximo 100).

" 5-7 número de medidas del standard.

" 9-12 longitud de onda.

" 13 Un 1 si son medidas en aire y un 2 si son en aceite.

" 15-16 Un — 5 si es la primera lectura (en aire) del conjunto de datos que se va a procesar. Blancos en caso contrario.

" 17-20 Primera lectura del standard.

" 21-24 Segunda lectura del standard.

etc...

(Si hace falta más de una ficha para acabar las medidas del standard se comenzará otra (u otras) en las columna 17 y se seguirá como antes.)

### 6.º Datos (2.ª parte). FORMAT (20 F4.2).

Columnas 1-4 Primera medida del problema.

" 5-8 Segunda medida del problema.

(Si hace falta más de una ficha se comenzará otra (u otras) en la columna 1.)

Cada problema consta de dos juegos de datos, uno en aire y otro en aceite, por este orden y con el mismo número de longitud de onda cada uno.

Detrás de cada problema se pondrán dos fichas más, perforadas como sigue:

- 1.<sup>a</sup> — columna 3    un 1  
                  columna 7    un 1
- 2.<sup>a</sup> — en blanco

El programa puede procesar tantos problemas seguidos como se quiera, estas dos fichas son la separación entre problema y problema, pero son necesarias aunque se vaya a procesar uno solo.

#### BIBLIOGRAFÍA

1. PILLER, H., y GEHLEN, K. von (1964): *Amer. Min.*, 49, 867-882.
2. LÓPEZ-SOLER, A., y BOSCH-FIGUEROA, J. M. (1971): *Acta Geológica Hispánica*, t. VI, núm. 3, 67-70.
3. CERVELLE, B., LEVY, C., y CAYE, R. (1968): *Bull. Soc. fr. Mineral. Cristallogr.*, 91, 468-478.
4. LÓPEZ-SOLER, A., y BOSCH-FIGUEROA, J. M. (1970): *Bull. Soc. fr. Mineral. Cristallogr.*, 93, 83-88.
5. COMMISSION ON ORE MICROSCOPY (IMA) (1970): International tables for the microscopic determination of crystalline substances absorbing in visible light. Departamento de Cristalografía y Mineralogía de Barcelona.